Simulation d'une décharge continue luminescente par la méthode de Monte Carlo

Djilali Benyoucef et Bachir Belmadani
Université de Hassiba ben Bouali, Chlef.
Faculté des sciences de l'ingénieur.
Department d'électrotechnique.

Abstract- In this work, one uses the method of Monte Carlo to simulate a luminescent discharge in continuous, in a gas electropositive (argon) a pressure of 1torr, this technique capable to couple the loaded particle movement (ion, electron) with the Poisson equation, it permit to determine the probability density function of the electronic energies (PDF) in plasma, the results are compared by its obtained by the kinetic and fluid models, [1], [2], they are similar.
Keywords: luminescent discharge, Monte Carlo methods and a low-pressure discharge.

Résumé – Dans ce travail, on utilise la méthode de Monte Carlo pour simuler une décharge luminescente en continu, dans un gaz électropositif (l'argon) à une pression de 1torr, cette technique capable de coupler le mouvement des particules chargées (ion, électron) avec l'équation de Poisson, elle permet de déterminer la fonction de densité de probabilité des énergies électroniques (FDP) dans le plasma, les résultats sont comparés par les résultats obtenus par les différents modèles cinétiques et fluides ,[1],[2], ils sont similaires.
Mots Clés : décharge luminescente, méthodes de Monte Carlo, décharge à basse pression.

I) Introduction :

L'axe des travaux dans les décharges luminescentes s'est tourné vers une modélisation plus détaillée de la décharge, une bonne modélisation permet de comprendre et de prédire leur comportement général, alors de contrôler et d'utiliser cette technologie dans les besoins industriels, telque, les semi-conducteurs, les panneaux de visualisation à plasma, le dépôt des couches minces, la gravure en micro-électronique et le traitement de surfaces[3]. Il existe trois types de modèles, le modèle fluide qui consiste à résoudre les équations hydrodynamiques[4], [5], [6], ces dernières utilisent les moments de la fonction de distribution, qui sont accessibles à la mesure, mais il n'est plus valable dans le cas de l'hors équilibre thermodynamique, le modèle cinétique basé sur la résolution directe de l'équation de Boltzmann [7], [8], ou bien par un autre modèle statistique basé sur des lois stochastiques et simule les trajectoires des particules chargées, la technique appelée méthode de Monte Carlo[9],[10].

II) Description du modèle :

Dans ce travail on utilise une géométrie cylindrique avec électrodes planes, le modèle à trois dimensions est réduit à deux dimensions axiale et radiale, dans ce modèle on considère qu'il n'y a pas d'effets radiaux (diffusion vers les électrodes), on considère aussi que le champ électrique est axial, et le modèle se réduit donc à une seule dimension, on garde la direction axiale et radiale de la vitesse. Le gaz de décharge est supposé à la température ambiante 300°k, on considère qu'il y'a quatre espèces des particules, les atomes neutres (Ar), les atomes excités (Ar^*), les ions positifs (Ar^+) et les électrons (e^-), la densité des particules chargées est très inférieure devant la densité des neutres. Pour cette raison on s'intéresse seulement aux collisions entre les particules chargées et les neutres, ces collisions sont :

-Les collisions élastiques, d'excitation et d'ionisation entre les électrons et les atomes neutres,

-Les collisions de transfert de charge et les collisions élastiques entre les ions et les atomes neutres de l'argon, les atomes excités se désexcitent spontanément.

III) Simulation des particules chargées par la méthode de Monte Carlo :

La méthode de Monte Carlo consiste à simuler un ensemble d'évènements (particules chargées) par un autre ensemble facilement réalisable (nombres aléatoires). Elle consiste à considérer une population des particules chargées et retracer l'histoire de chacune d'elle depuis son émission jusqu'à sa disparition, les trajectoires des particules chargées sont données par la loi de Newton.

$$z = z_0 + v_{z0}\Delta t + \frac{q}{2m}E_{z0}(\Delta t)^2$$
$$r = r_0 + v_{r0}\Delta t \qquad (1)$$
$$v_z = v_{z0} + \frac{q}{m}E_{z0}\Delta t$$
$$v_r = v_{r0}$$

tel que z_0 et r_0 sont respectivement les positions axiale et radiale de la particule , z et r sont les positions axiale et radiale après un pas de temps Δt ; v_{z0} et v_{r0} sont respectivement les vitesses axiale et radiale à l'instant t_0 ; v_z et v_r les vitesses axiale et radiale à l'instant $t_0+\Delta t$, E_{z0} est le champ électrique dans la position z_0 , et q et m sont respectivement la charge et la masse de la particule, l'énergie cinétique est donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon = \frac{1}{2}m\left(v_r^{\,2} + v_2^{\,2}\right) \qquad (2)$$

Le champ électrique est obtenu par la résolution de l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2U(z)}{dz^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0}\left(ni(z) - ne(z)\right) \qquad (3)$$
$$E = -\frac{dU(z)}{dz}$$

ni(z) et *ne(z)* sont respectivement la densité des ions positifs et la densité des électrons.

La probabilité de collision, la nouvelle énergie et la direction juste après la collision sont déterminées par un tirage des nombres aléatoires.

$$P = 1 - \exp(-n_0\sigma_{tot}(\varepsilon)\Delta s) \qquad (4)$$

où P : la probabilité totale de collision, Δs est la distance entre le point (z_0,r_0) et le point (z,r), n_0 la densité des neutres et $\sigma_{tot}(\varepsilon)$ la section efficace totale de collision en fonction de l'énergie ε .Le tirage d'un nombre aléatoire permet de dire si il y'a une collision ou non, si $R<P$ il y'a une collision, si $R>P$ pas de collision, maintenant si $R<P$, il faut tirer un autre nombre aléatoire (R) pour déterminer le type de cette collision, en subdivisant l'intervalle des nombres aléatoires en sous intervalles chacun correspond à une fraction de probabilité, elles sont calculées à partir des relations suivants[11] :

Pour les électrons :

$$\sigma_{e,tot}(\varepsilon) = \sigma_{ionis}(\varepsilon) + \sigma_{exc}(\varepsilon) + \sigma_{e,elas}(\varepsilon)$$
$$P_{ionis} = \frac{\sigma_{ionis}(\varepsilon)}{\sigma_{e,tot}(\varepsilon)}$$
$$P_{exc} = \frac{\sigma_{exc}(\varepsilon)}{\sigma_{e,tot}(\varepsilon)} \qquad (5)$$
$$p_{elas} = \frac{\sigma_{elas}(\varepsilon)}{\sigma_{e,tot}(\varepsilon)}$$

Pour les ions :

$$\sigma_{i,tot}(\varepsilon) = \sigma_{tran-charge}(\varepsilon) + \sigma_{i,elas}(\varepsilon)$$
$$P_{tran-charge} = \frac{\sigma_{tran-charge}(\varepsilon)}{\sigma_{i,tot}(\varepsilon)} \qquad (6)$$
$$P_{i,elas} = \frac{\sigma_{i,elas}(\varepsilon)}{\sigma_{e,tot}(\varepsilon)}$$

où P_{ionis}, P_{exc} et $P_{e,elas}$ sont respectivement les fraction de probabilité d'ionisation, d'excitation et des collisions élastiques avec les atomes neutres, $P_{tran-charge}$ et $P_{i,elas}$ sont respectivement les fractions de probabilité de transfert de charge et des collisions élastiques avec les atomes neutres. L'énergie de chaque particule et sa direction sont déterminer aussi par tirage des nombres aléatoires, après la collision la particule fait un vol libre et la procédure se répète après un pas de temps.

III-1) Simulation des électron :

Les électrons secondaires émis par la cathode sous l'effet de bombardement ionique ont une énergie distribue entre 0 et 6 ev avec un maximum de 4 ev et suivant un angle axial θ_0 et un angle radial φ_0 , [11], tel que :

$$\cos\theta_0 = R_1$$
$$\varphi_0 = 2\pi R_2 \qquad (7)$$

R_1 et R_2 des nombres aléatoires tiré au hasard, la nouvelle énergie et la direction dépendent du type de la collision.

a) Ionisation: dans le cas d'ionisation l'énergie total avant la collision est divisé entre l'électron primaire et l'électron secondaire.

$$\varepsilon_{sec} = R_{ionis}\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{ionis}}{2}$$
$$\varepsilon_{pri} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{ionis} - \varepsilon_{sec} \qquad (8)$$

où ε_{sec},ε_{pri} et ε_0 sont respectivement l'énergie de l'électron secondaire, l'énergie de l'électron primaire et l'énergie de l'électron primaire juste avant la collision. R_{ionis} est un nombre aléatoire et ε_{ionis} l'énergie d'ionisation d'argon (ε_{ionis}=15.76 ev).

b) Excitation: la nouvelle énergie est donnée par la relation suivante :

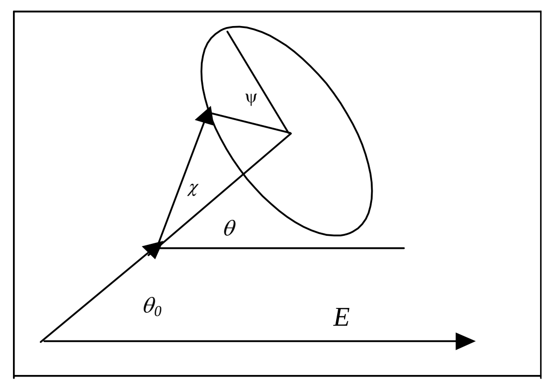
$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_{exc} \quad (9)$$

ε_{exc} et ε_0 sont respectivement l'énergie d'excitation (ε_{exc}=11.5 ev) et l'énergie de l'électron incident juste avant la collision.

c) Collisions élastiques : l'énergie cinétique de l'électron après une collision élastique est donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left(1 - 2\frac{m_e}{m_{at}}(1 - \cos(\chi)) \right) \quad (10)$$

où m_e et m_{at} sont respectivement la masse de l'électron et la masse de l'atome cible et χ l'angle



de diffusion axial dans le repère de collision.

fig.1 :schéma représentant la séquence des collisions.

L'angle axial juste après la collision est donnée par la relation suivante :

$$\cos\theta = \cos\theta_0 \cos\chi - \sin\theta_0 \sin\chi \cos\psi \quad (11)$$

telque θ_0 l'angle axial juste avant la collision, χ et ψ les angles de diffusion axial et azimutal. Ces angles sont calculer à partir de tirage des nombres aléatoires R_χ et R_ψ .

$$\cos\chi = 1 - R_\chi$$

$$\psi = 2\pi R_\psi \quad (12)$$

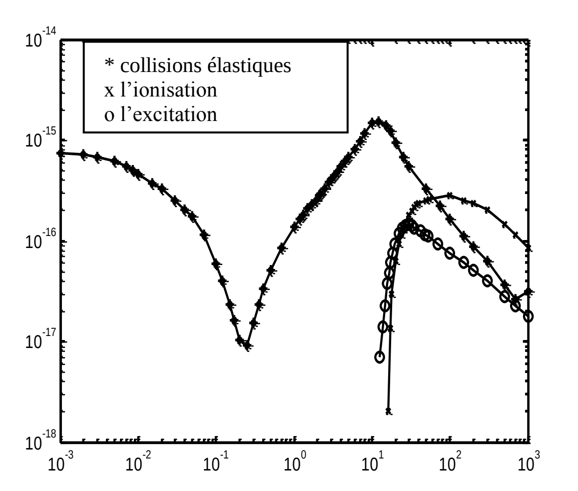


fig.2 : les sections efficaces de collision e^-/Ar [12],[13]

III-2) Simulation des ions positifs :

Dans le cas d'ionisation non seulement un électron est produit, mais aussi un ion positif, le transport de cet ion est simulé par la méthode de Monte Carlo, l'indépendance de simulation entre les électrons et les ions est due à la faible ionisation du gaz (les collisions électron-ion sont négligeables). L'énergie et la direction de l'ion juste après la collision dépend avec le type de collision.

a) Transfert de charge : dans ce type de collision la charge de l'ion se transfert vers l'atome et le nouveau ion démarre avec une vitesse nulle suivant la direction du champ, la section efficace de ce type de collision est supposée constante $\sigma_{tran\text{-}charge} = 10^{-15}$ cm^2[14],

b) Collisions élastiques : les collisions entre les ions et les atomes d'argon sont considérées comme des collisions entre des sphères dures, la section efficace est donnée par la relation suivante :

$$\sigma_{i,elas} = 4\pi R_{Ar}^2 \quad (13)$$

où R_{Ar} est le rayon de l'atome de l'argon, l'énergie de l'ion juste après la collision est donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon_{ion} = \varepsilon_{0,ion}(1 - \cos^2\chi) \quad (14)$$

où $\varepsilon_{0,ion}$ l'énergie de l'ion juste avant la collision et χ l'angle de diffusion axial dans le repère de collision.

IV) Résultats et discussion :

A titre d'illustration sur l'utilisation de la méthode de Monte Carlo, on présente une application à une décharge continue luminescente pour un gaz d'argon à 1torr de pression, un espace inter-électrode de 2 cm et une tension continue sur l'électrode de gauche de (–300 v) et l'autre est mise à la terre, le coefficient d'émission électronique secondaire (γ= 0.12). Les résultats numériques sont obtenus avec un pas en temps $\Delta t = 2.10^{-11}$sec et un pas spatial Δz=0.04 cm.

La figure (3) représente la densité des particules chargées (électrons et ion positifs), cette densité est très importante dans le plasma que dans les gaines car les électrons émis par la cathode sous l'effet de bombardement ionique gagnent l'énergie dans la gaine cathodique et excite le milieu d'une façon intense dans la lisière de la gaine. Le plasma est caractérisé par une neutralité électrique d'ou un champ électrique presque nul, par contre les gaines sont caractérisées par des charges d'espace positives qui sont responsables à la chute cathodique et anodique.

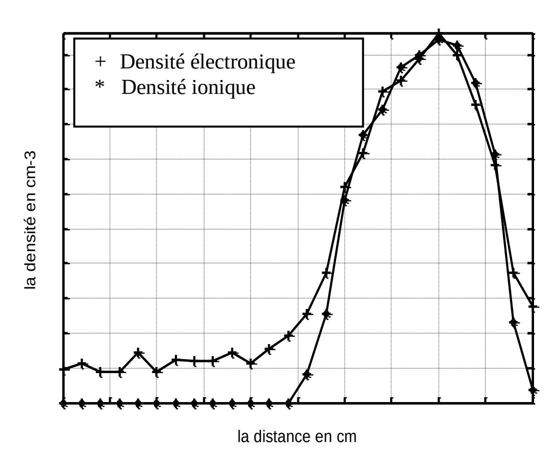


fig.3 : la densité des particules chargées dans une décharge luminescente en continu

Les figures (4) et (5) représentent respectivement, la variation spatial de champ électrique et la variation spatial de potentiel, la chute dans la gaine cathodique due à la densité des charges d'espace positives, dans le plasma, le champ électrique est pratiquement nul et le potentiel est constant, car la densité des électrons est égale à celle des ions positifs, dans la gaine anodique la chute est due à la grande différence de mobilité entre les électrons et les ions et donc le potentiel du plasma est toujours supérieur à celle dans les électrodes.

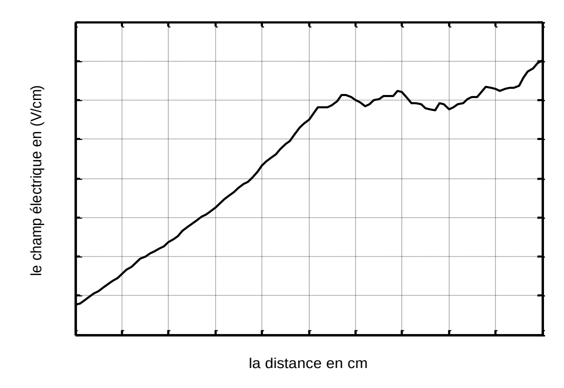


fig.4 : le champ électrique dans une décharge luminescente en continu

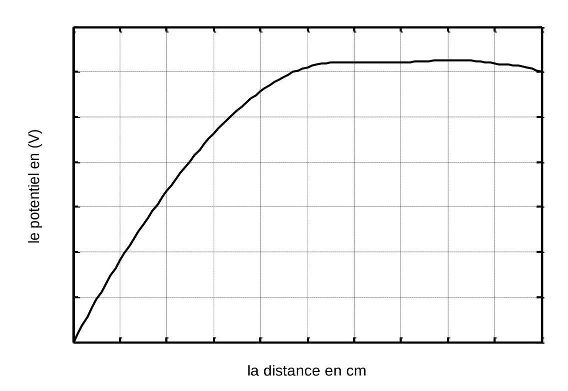


fig.5 : le potentiel dans une décharge luminescente en continu

Les figures (6) et (7) représentent respectivement la variation spatiale des densités des courants électronique et ionique et la variation spatiale de la densité de courant total, ce dernier est égal à la somme de deux courants ionique et électronique, dans la gaine anodique la densité des électrons est trop faible, alors le courant total est un courant ionique, dans le plasma la densité des ions est importante, mais leur courant est faible à cause de leur faible mobilité et le courant total est un courant électronique, par contre dans la gaine anodique le courant électronique est supérieur à celle dans le plasma, ce dernier compense le courant ionique qui du à la chute anodique, le courant total est pratiquement constant à tout endroit de la décharge avec une valeur de l'ordre de 0.0171 mA/cm^2.

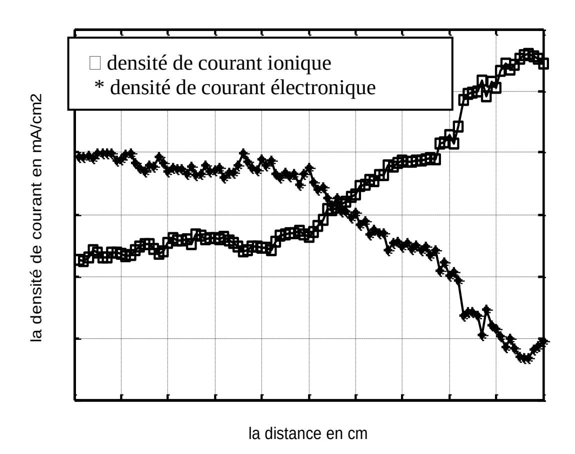


fig.6 : le densité des courants électronique et ionique dans une décharge luminescente en continu

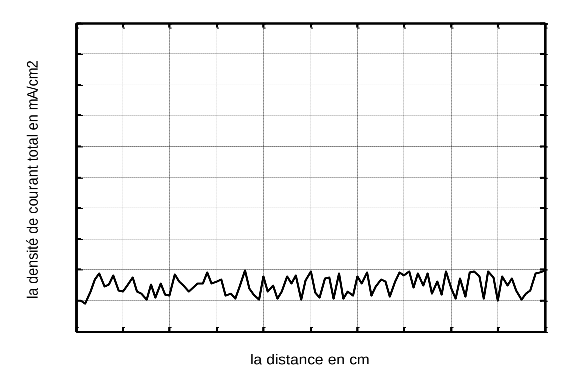


fig.7 : la densité de courant total dans une décharge luminescente en continu

La figure (8) représente la fonction de densité de probabilité des énergies électroniques dans le plasma(FDP), elle est composée de deux parties avec une énergie moyenne de 6.29 eV , partie corps pour les faibles énergies où se trouve le grand nombre des électrons, ces derniers gouvernent pour l'essentiel les phénomènes de transports et la partie queue pour les énergies

supérieures au premier seuil d'excitation, ils sont responsables des collisions inélastiques.

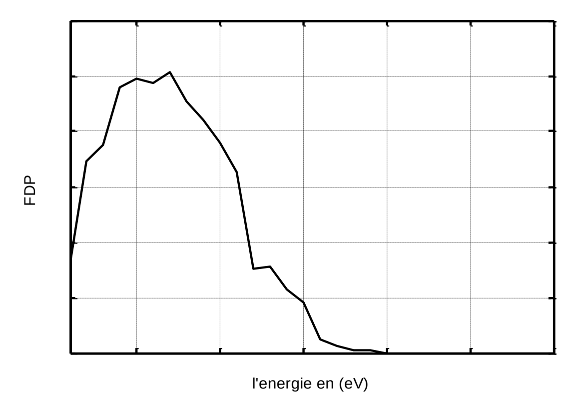


fig.6 : la fonction de densité de probabilité des énergies électroniques dans le plasma (FDP)

V) Conclusion :

L'élaboration d'un modèle statistique basé sur des lois stochastiques permet de simuler les trajectoires des particules chargées par une méthode de type Monte Carlo, le couplage avec l'équation de Poisson donne un modèle auto-cohérent. De ce dernier, on peut prédire les caractéristiques générales de ce type de décharges et de détermine d'une manière indirecte la fonction de densité de probabilité des énergies électroniques, d'où la résolution de l'équation de Boltzmann, on peut aussi introduit facilement le second coefficient de Towsend et étudier le comportement des électrons et des ions dans les situations hors équilibre thermodynamique (gaines), alors la prédiction et le contrôle du flux ionique et le potentiel surtout au voisinage de la cathode où les ions positifs sont accélérés et bombardent le substrat avec des énergies qui dépendent à la chute de potentiel dans la gaine, la distribution en énergie des ions détermine le dégât d'anisotropie de gravure.

Références:

[1] A.Bogaerts, B.Sc.Thesis, University of Antwerp (1993).
[2] John. Lowke and D. Kenneth Davies, J.Appl. Phys. 48(12), 4991(1977).
[3] W.Vieth and J.C.Hunke, Spectochim. Acta 46 B,177(1991).
[4] W.Schmitt, W.E Kohler and H. Ruder, J.Appl. 71, 5783(1992).
[5] M.Meyyappan and J.P. Kreskovsky, J.Appl. Phys. 68, 1506(1990).
[6] J.P. Boeuf, J.Appl.Phys. 63, 2782(1988).
[7] R.S. Robinson, J.Vac.Sci.Technol.16, 185(1979).
[8] I.Abril, A.Gras-Marti and J.A.Valles-Abarca, J.Vac.Sci.Technol. A4, 1773(1986).
[9] Kenji Maeda, Tohiaki Makabe and Nobuhiko Phys.Rev.E, Vol. 55, Number 5, 5901(1997).
[10] Z.Lj.Petrovic and V.D.Stojanovic, J.Vac.Sci. Technol.A, Vol. 16, NO1, 329(1998).
[11] A. Bogaerts, M. V. Straaten, R. Gibels, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 1995, vol. 50, no 2, p. 179-196.
[12] Hunter et Cristophoo., J.Chem.Phys. (1984).
[13] A.V.Phelps. Data. By ftp. Nov.(1997).
[14] M. Ardehali, H. Matsumoto, IEEE transactions on plasma science, 1997, vol. 25, no 5, p. 1081-1085.